

Extension d'une méthode Monte-Carlo dans un cadre instationnaire

Stagiaire : Mathis Fitoussi

Encadrement : Laetitia Laguzet

Organisme d'accueil : CEA

Master 2 Mathématiques pour les Sciences du Vivant

1 Introduction & IMC

2 Méthodes de Monte Carlo pour les équations de transport

3 Approximations de $(x, \omega) \mapsto u(t_n, x, \omega)$ en méthode adjointe

4 Résultats - Comparaison MCA / MCD

5 Propagation de l'erreur d'approximation

6 Perspectives

Équations du transfert radiatif

$$\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x, \omega) + \omega \cdot \nabla_x u(t, x, \omega) + \sigma_T u(t, x, \omega) = \frac{1}{4\pi} \sigma_T a c T^4 \quad (1)$$

$$\frac{\partial u_m}{\partial t}(t, x) = \sigma_T \left[\int_S u(t, x, \omega) d\omega - a c T^4(t, x) \right] \quad (2)$$

Où :

- $\omega \in S = \{(x, y, z) \in \mathbb{R}^3 : x^2 + y^2 + z^2 = 1\}$: angle de propagation
- $x \in \mathcal{D} \subset \mathbb{R}^3$
- $\sigma_T = \sigma_T(x, t)$
- a est une constante, c est la vitesse de la lumière
- $u_m(t, x)$ est la densité énergétique du matériau
- $u_r = a T^4$ et $\beta := \frac{\partial u_r}{\partial u_m}$
- $T = T(x, t)$ est la température du matériau

On fait les approximations suivantes :

$$T_n(x) = T(x, t_n)$$

$$\beta_n(x) = \beta(x, t_n) = \frac{\partial u_r / \partial T}{\partial u_m / \partial T} = \frac{4aT_n^3(x)}{c_v(x, T_n)}$$

$$\sigma_{T,n}(x) = \sigma_T(x, t_n)$$

Et on prend ces quantités constantes sur chaque maille, afin de se ramener à une équation de transport sur un court intervalle $[t_n, t_{n+1}]$:

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x, \omega) + \omega \cdot \nabla_x u(t, x, \omega) + \sigma_{T,n}(x) u(t, x, \omega) \\ = \sigma_{s,n}(x) \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} + f_n(x) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t}(t, x, \omega) + \omega \cdot \nabla_x u(t, x, \omega) + \sigma_{T,n}(x) u(t, x, \omega) \\ = \sigma_{s,n}(x) \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} + f_n(x) \end{aligned} \quad (3)$$

Les coefficients $\sigma_{T,n}$, $\sigma_{s,n}$ et la fonction f_n sont essentiellement calculés en fonction de $T_n = T(x, t_n)$ et moyennés par maille.

Pour calculer $\sigma_{T,n+1}$, $\sigma_{s,n+1}$ et f_{n+1} , on a besoin d'évaluer sur chaque maille M la quantité

$$\int_{t_n}^{t_{n+1}} \int_M \int_S u(t, x, \omega) d\omega dx dt$$

Principe des approximations par Monte Carlo :

- On a besoin de calculer une intégrale I
- On exprime I sous forme d'une espérance d'une variable aléatoire que l'on sait simuler
- On génère un grand nombre de variables aléatoires, et leur moyenne tend vers la quantité voulue

Exemple : pour $X \sim \mathcal{U}([0, 1])$,

$$I = \int_0^1 g(x) dx = \mathbb{E}(g(X))$$

On génère des variables aléatoires X_1, \dots, X_N, \dots suivant $\mathcal{U}([0, 1])$. Si $\mathbb{E}(|g(X)|) < \infty$, alors, presque sûrement :

$$\text{(LFGN)} : \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g(X_k) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} I$$

Exemple : pour $X \sim \mathcal{U}([0, 1])$,

$$I = \int_0^1 g(x) dx = \mathbb{E}(g(X))$$

On génère des variables aléatoires X_1, \dots, X_N, \dots suivant $\mathcal{U}([0, 1])$. Si $\mathbb{E}(|g(X)|) < \infty$, alors, presque sûrement :

$$\text{(LFGN)} : \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g(X_k) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} I$$

D'après le théorème central limite, on a la convergence en loi :

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \times \frac{I_N - I}{\sigma_g} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mathcal{N}(0, 1)$$

Rappels Monte Carlo - Échantillonnage

On peut changer la loi selon laquelle on échantillonne les VA. Pour X de densité f ,

$$I = \int g(x)f(x)dx = \mathbb{E}(g(X))$$

On génère des variables aléatoires X_1, \dots, X_N, \dots suivant f . On a, à nouveau :

$$I_N = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N g(X_k) \xrightarrow{N \rightarrow \infty} I$$

$$\frac{1}{\sqrt{N}} \times \frac{I_N - I}{\sigma_g} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \mathcal{N}(0, 1)$$

f est la fonction d'échantillonnage et g la fonction d'évaluation, mais leurs rôles sont échangeables

Différences méthodes adjointe et directe

On pose $\phi : (x, \omega) \mapsto \frac{1_M(x)}{V_M} \times \frac{1_S(\omega)}{4\pi}$ en sorte que :

$$I_{u_0}(t, \phi) := \frac{1}{4\pi V_M} \int_M \int_S u(t, x, \omega) d\omega dx = \int_{\mathbb{R}^3} \int_S u(t, x, \omega) \phi(x, \omega) d\omega dx$$

On va voir que l'on peut également calculer cette intégrale par des méthodes de MC car u suit l'équation (3) et ϕ est une fonction connue.

Idée générale :

- En MC direct, on simule un processus partant de la densité u_0 puis on prend ϕ pour l'évaluation en fin de procédure
- En MC adjointe, on fait exactement l'inverse

Interprétation de l'équation de transport

$$\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u + (\sigma_a + \sigma_s)u = \sigma_s \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} + f$$

D'après cette équation, les photons subissent les événements suivants :

- $\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u \implies$ direction de propagation $\omega \in S$, avec une vitesse de c

Interprétation de l'équation de transport

$$\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u + (\sigma_a + \sigma_s)u = \sigma_s \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} + f$$

D'après cette équation, les photons subissent les événements suivants :

- $\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u \implies$ direction de propagation $\omega \in S$, avec une vitesse de c
- $\sigma_a u \implies$ absorption. Terme en $e^{-\sigma_a t}$ dans nos équations.

Interprétation de l'équation de transport

$$\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u + (\sigma_a + \sigma_s)u = \sigma_s \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} + f$$

D'après cette équation, les photons subissent les événements suivants :

- $\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u \implies$ direction de propagation $\omega \in S$, avec une vitesse de c
- $\sigma_a u \implies$ absorption. Terme en $e^{-\sigma_a t}$ dans nos équations.
- $\sigma_s \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} \implies$ scattering (dispersion), i.e. collision et changement de direction de propagation.

Interprétation de l'équation de transport

$$\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u + (\sigma_a + \sigma_s)u = \sigma_s \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} + f$$

D'après cette équation, les photons subissent les événements suivants :

- $\frac{1}{c} \frac{\partial u}{\partial t} + \omega \cdot \nabla_x u \implies$ direction de propagation $\omega \in S$, avec une vitesse de c
- $\sigma_a u \implies$ absorption. Terme en $e^{-\sigma_a t}$ dans nos équations.
- $\sigma_s \int_S u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{4\pi} \implies$ scattering (dispersion), i.e. collision et changement de direction de propagation.
- $f \implies$ terme source créateur de nouveaux photons

L'idée d'une simulation Monte-Carlo est alors de simuler un grand nombre de photons subissant ces événements afin d'estimer $u(t, x, \omega)$.

Definition (Processus direct)

Processus markovien déterministe par morceaux $(X(t), \Omega(t))_{t \geq 0}$ sous-jacent à la méthode Monte Carlo directe

- La densité de la loi initiale pour $(X(0), \Omega(0))$ est \tilde{u}_0
- L'intensité des sauts est σ_s . Lors d'un saut, $\Omega(t)$ prend une valeur aléatoire selon une loi uniforme sur S et $X(t)$ ne change pas. Entre les sauts, le processus vérifie

$$\frac{d}{ds} \begin{pmatrix} X(s) \\ \Omega(s) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c\Omega(s) \\ 0 \end{pmatrix}$$

→ **Les particules sont en trajectoire rectiligne uniforme à la vitesse c entre deux sauts de l'angle de propagation Ω , qui surviennent à des instants suivant une loi $\mathcal{E}(\sigma_s)$**

Théorème (Formule de Fokker-Plank)

Pour u solution de (3) avec pour condition initiale u_0 , $\forall \phi \in L^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$,

$$\begin{aligned}
 I_{u_0}(t, \phi) &:= \int \int u(t, x, \omega) \phi(x, \omega) dx d\omega \\
 &= \alpha \mathbb{E}_{0, \tilde{u}_0} \left[\phi(X(t), \Omega(t)) e^{-\int_0^t \sigma_a(\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} \right] \\
 &\quad + \int_0^t \gamma(s) \mathbb{E}_{s, \tilde{f}(s, \cdot)} \left[\phi(X(t), \Omega(t)) e^{-\int_s^t \sigma_a(\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} \right] ds
 \end{aligned}$$

Où

- $\alpha = \int_{\mathbb{R}^3} \int_S u_0$ et $\tilde{u}_0 = \frac{u_0}{\alpha}$
- $\gamma(t) = \int_{\mathbb{R}^3} \int_S f$ et $\tilde{f} = \frac{f}{\gamma}$

Théorème (Formule de Fokker-Plank)

Pour u solution de (3) avec pour condition initiale u_0 , $\forall \phi \in L^1(\mathbb{R}^2, \mathbb{R})$,

$$\begin{aligned} I_{u_0}(t, \phi) &:= \int \int u(t, x, \omega) \phi(x, \omega) dx d\omega \\ &= \alpha \mathbb{E}_{0, \tilde{u}_0} \left[\phi(X(t), \Omega(t)) e^{-\int_0^t \sigma_a(\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} \right] \\ &\quad + \int_0^t \gamma(s) \mathbb{E}_{s, \tilde{f}(s, \cdot)} \left[\phi(X(t), \Omega(t)) e^{-\int_s^t \sigma_a(\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} \right] ds \end{aligned}$$

- On doit générer des particules supplémentaires pour le terme source
- On ne maîtrise pas le nombre de particules dans chaque maille en fin de procédure \rightarrow pas de contrôle de la variance **par maille**
- Il n'est pas nécessaire de connaître u_0 , il suffit d'avoir à disposition des particules générées selon \tilde{u}_0

Definition (Processus adjoint)

Processus markovien déterministe par morceaux $(X(t), \Omega(t))_{t \geq 0}$ sous-jacent à la méthode Monte Carlo adjointe

- La loi initiale est déterministe : $X(0) = x$ et $\Omega(0) = \omega$
- L'intensité des sauts est σ_s . Lors d'un saut, $\Omega(t)$ prend une valeur aléatoire selon une loi uniforme sur S et $X(t)$ ne change pas. Entre les sauts, le processus vérifie

$$\frac{d}{ds} \begin{pmatrix} X(s) \\ \Omega(s) \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c\Omega(s) \\ 0 \end{pmatrix}$$

Si on veut calculer des expressions de la forme $\int \int u(t, x, \omega) \phi(x, \omega) dx d\omega$, on tire x et ω selon la densité $\tilde{\phi} = \frac{\phi}{\int \int \phi}$

Théorème (Formule de Feynman-Kac)

Pour une condition initiale u_0 donnée,

$$u(t, x, \omega) = \mathbb{E}_{x, \omega} \left[u_0(X(t), \Omega(t)) e^{-\int_0^t \sigma_a(t-\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} + \int_0^t f(t-s, X(s), \Omega(s)) e^{-\int_0^s \sigma_a(t-\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} ds \right]$$

est solution de (3)

- On peut utiliser les mêmes particules pour le terme source
- Toutes les particules qui sont restées dans le maillage sont utilisées en fin de procédure
- Nécessite de connaître u_0 pour l'évaluation

Résumé des méthodes

	MC Directe	MC Adjointe
Génération initiale des particules	\tilde{u}_0	$\tilde{\phi}$
Évaluation en fin de parcours	ϕ	u_0
Ajout d'un terme source	Nécessite des particules supplémentaires	Ne nécessite pas de particules supplémentaires
Nb de particules par maille	Imprévisible	Imposable
Connaissance nécessaire de \tilde{u}_0	Via un échantillon seulement	Connaissance complète nécessaire

IMC : on travaille sur des intervalles successifs (t_i, t_{i+1})

- Méthode directe : particules générées selon u_0 en tout début de procédure, puis conservées à chaque pas de temps + gestion de la population de particules au cours du temps
- Méthode adjointe : particules générées selon ϕ en début de chaque pas de temps, puis évaluées en fin de pas de temps selon $u(t_i, \cdot, \cdot)$

→ Il faut donc pouvoir approcher les $u(t_i, \cdot, \cdot)$

4 méthodes d'approximation étudiées :

- Par valeurs moyennes : on maille l'espace et on calcule la valeur moyenne de u sur chaque maille.

$$u_{n+1}^{moy}(x, \omega) = \sum_M l_{u_n}(t_{n+1}, 1_M) 1_M(x, \omega)$$

- Par interpolation linéaire : on calcule la valeur de u en certains points, et on interpole entre ces points
- Par des polynômes de degré arbitraire : on se fixe un un degré d et on sélectionne le polynôme qui minimise l'erreur en norme 2 en un certain nombre de points
- Par des polynômes de Bernstein : permettent d'approcher de manière uniforme la fonction u via sa valeur en un certain nombre de points.

$$\frac{\partial u(t, \omega)}{\partial t} + \sigma_T u(t, \omega) = \sigma_s \int_{-1}^1 u(t, \omega') \frac{d\omega'}{2} + f$$

- Pas de dépendance en espace \implies solution analytique
- Pour l'IMC, on cherche à calculer des expressions du type :

$$\int_M \int_S \int_{t_i}^{t_{i+1}} u(t, x, \omega) dt d\omega dx$$

On transpose le problème de l'intégrale "sur une maille" en un problème d'intégrale sur "une partie de sphère" D en ω et on s'intéresse à trouver de bonnes estimations de

$$\int_D \int_{t_i}^{t_{i+1}} u(t, \omega) dt d\omega$$

Configuration des tests

Dépendance spatiale supprimée \implies solution analytique à (3)

Maillage en espace \implies Maillage en angle $\omega \in (-1, 1)$ (**Étude 0D-Plan**)



On calcule l'erreur en 60 instants $t \in (0, 2)$, avec un instant intermédiaire en $t_1 = 1$ sur

$$t \mapsto \int_M u(t, \omega) d\omega$$

pour la maille $M = (-0.6, -0.4)$

Configuration des tests

Dépendance spatiale supprimée \implies solution analytique à (3)
Maillage en espace \implies Maillage en angle $\omega \in (-1, 1)$ (**Étude 0D-Plan**)

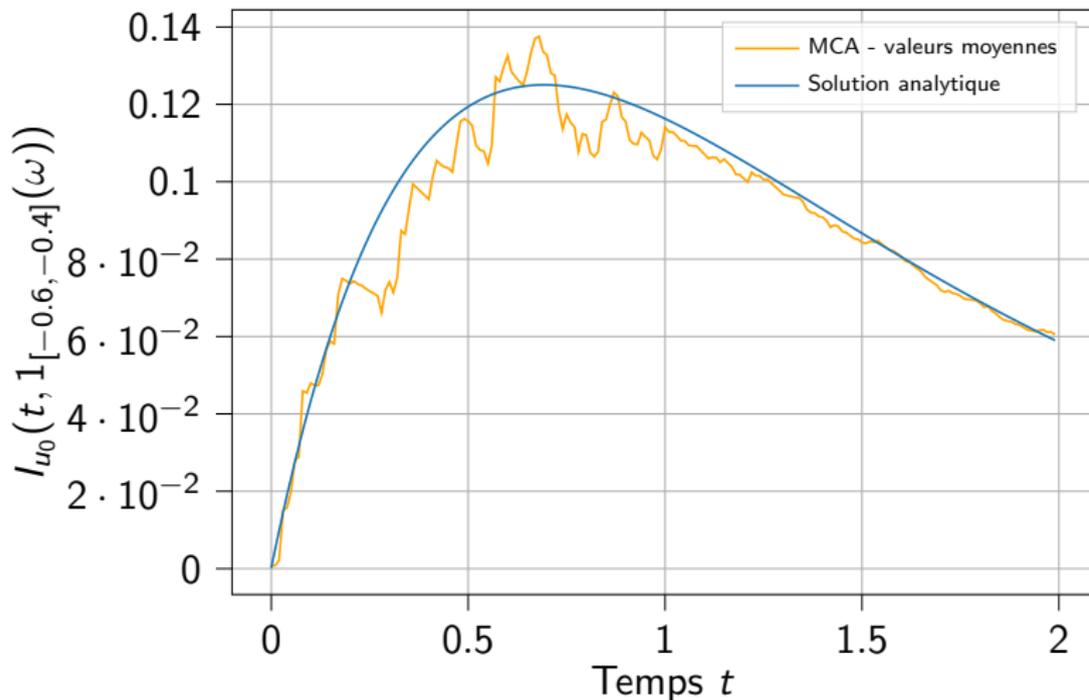


Tests réalisés sur 4 fonctions u_0 :

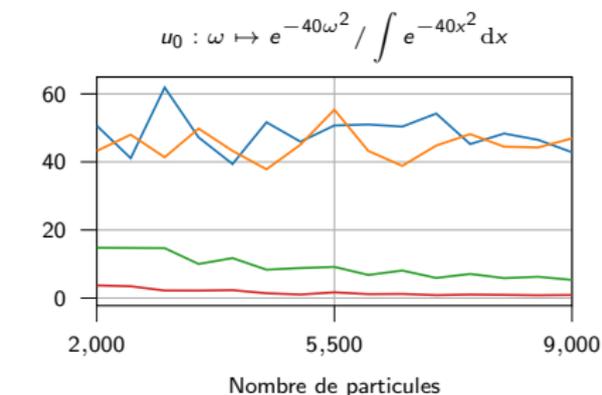
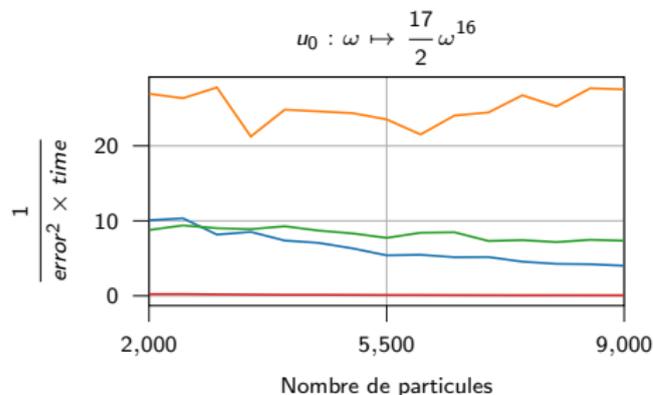
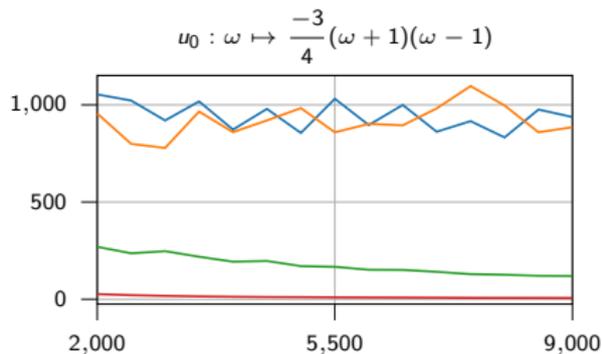
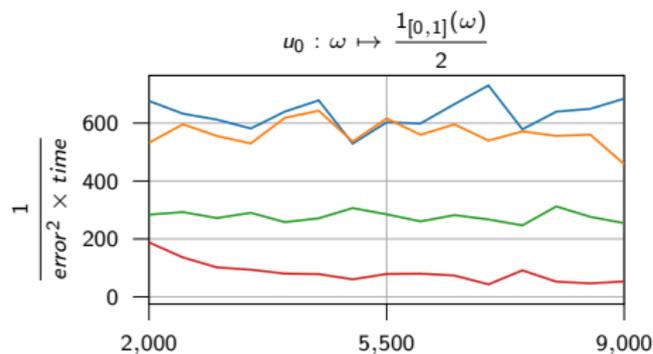
Expression	$\sup_{\omega \in [-1,1]} \left \frac{\partial u}{\partial \omega}(t, \omega) \right $	$\sup_{\omega \in [-1,1]} \left \frac{\partial^2 u}{\partial \omega^2}(t, \omega) \right $
$\omega \mapsto \frac{1_{[0,1]}(\omega)}{2}$	$+\infty$	$+\infty$
$\omega \mapsto -3 \frac{(\omega+1)(\omega-1)}{4}$	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$
$\omega \mapsto \frac{17}{2} \omega^{16}$	136	2040
$\omega \mapsto \frac{e^{-40\omega^2}}{\int e^{-40x^2} dx}$	≈ 285	≈ 22837

Exemple de trajectoire

Exemple de trajectoire en 200 points avec instant intermédiaire en $t = 1$



Résultats



Valeurs moyennes Interpolation linéaire Polynôme degré 5 Bernstein

Arguments en faveur de l'approximation par valeurs moyennes :

- Meilleur mérite : temps de calcul réduit, précision élevée, simplicité de mise en place
- Les calculs intermédiaires nécessaires pour la mettre en place sont réutilisés pour IMC
- Conserve l'énergie totale :

$$\int_{-1}^1 u(t_1, \omega) d\omega = \int_{-1}^1 u_1^{moy}(\omega) d\omega$$

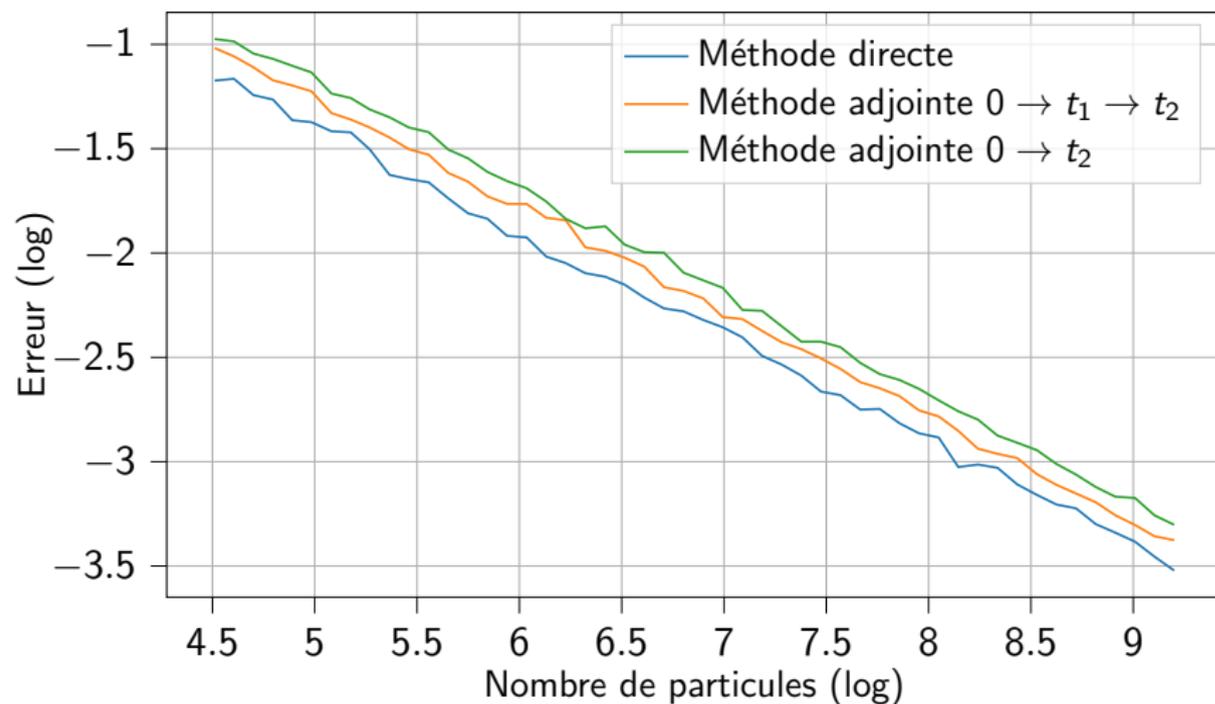
1er test :

- Pas de terme source
- Énergie initiale $u_0 : \omega \mapsto 1_{[0,1]}(\omega)/2$
- On calcule l'erreur en 60 instants $t \in (0, 4)$, avec un instant intermédiaire en $t = 2$ sur

$$I_{u_0, N}(t, 5 \times 1_{[-0.6, -0.4]}) = \int_{-0.6}^{-0.4} u(t, \omega) d\omega$$

- Nombre total de particules testées : $N \in \{100, 300, \dots, 9900\}$

Comparaison MCA/MCD - 0D Sans source (log-log)



Ajout d'un terme source - calcul de l'intégrale du terme source : déterministe vs FullMC

Méthode directe : calcul de l'intégrale

$$\int_0^t \gamma(s) \mathbb{E}_{s, \tilde{f}(s, \cdot)} \left[\phi(X(t), \Omega(t)) e^{-\int_s^t \sigma_a(\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} \right] ds$$

Déterministe : calcul de $\mathbb{E}_{s, \tilde{f}(s, \cdot)}$ en plusieurs points

Stochastique : émission de particules à des instants aléatoires au cours de la simulation

Ajout d'un terme source - calcul de l'intégrale du terme source : déterministe vs FullMC

Méthode adjointe : calcul de l'intégrale

$$\int_0^t f(t-s, X(s), \Omega(s)) e^{-\int_0^s \sigma_a(t-\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} ds$$

Déterministe :

évaluation des particules
en plusieurs points

Stochastique :

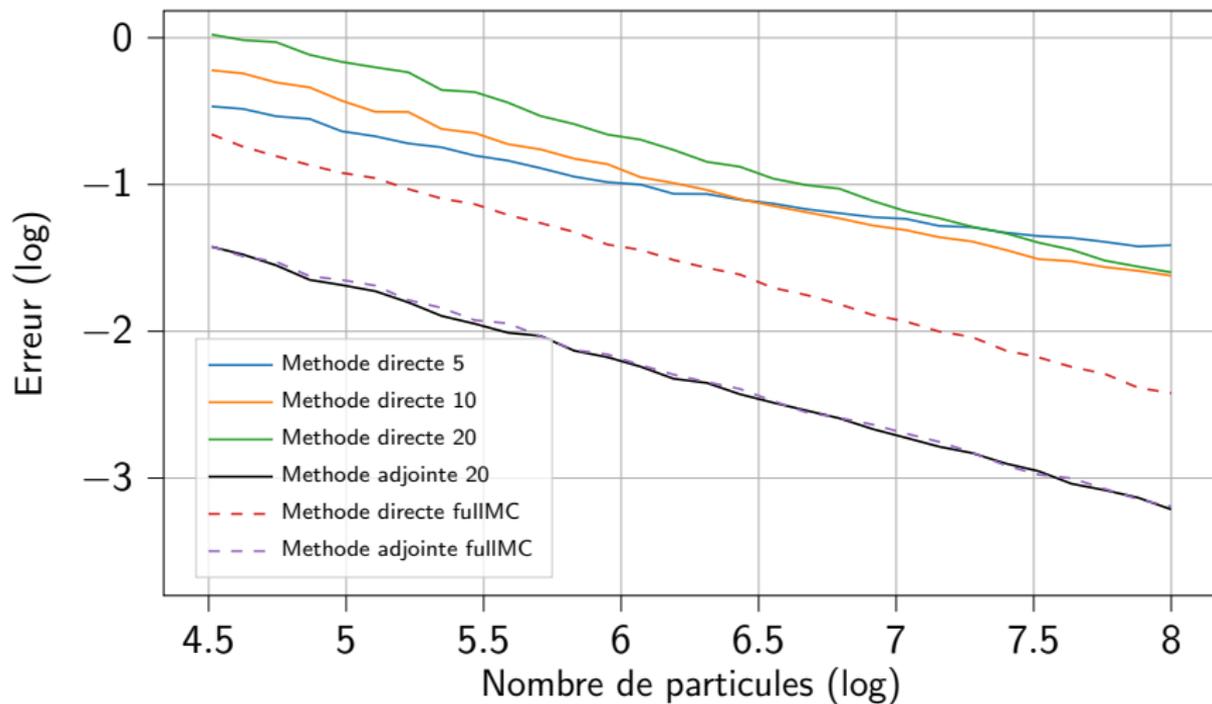
évaluation des parti-
cules en des instants
aléatoires

FullMC : mêmes ins-
tants pour tous (environ
20)

FullMC-1 : 1 instant
aléatoire pour chaque
particule

Comparaisons MCA / MCD - Source non-nulle

Comparaison MCA/MCD - 0D Avec source (log-log)



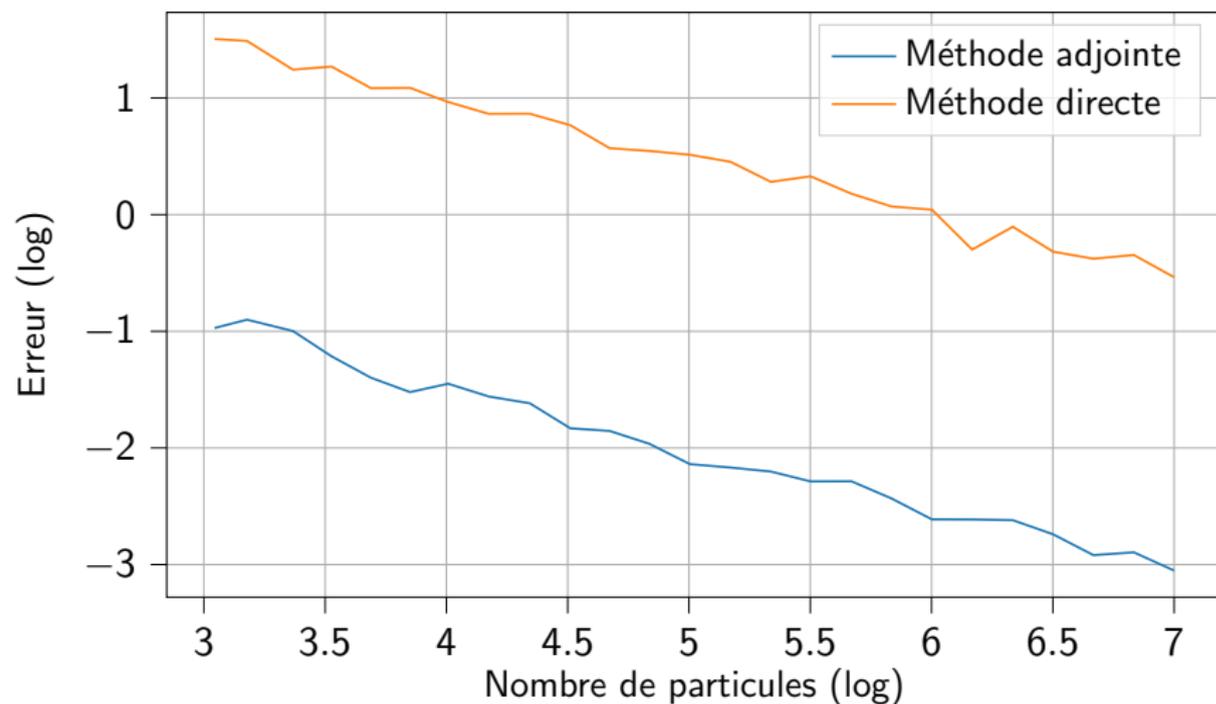
On travaille en 1D sur le maillage test suivant :

x	(0,1)	(1,2)	(2,3)	(3,4)	(4,5)
σ_a	1	2	1	3	2
σ_s	1	2	1	3	2

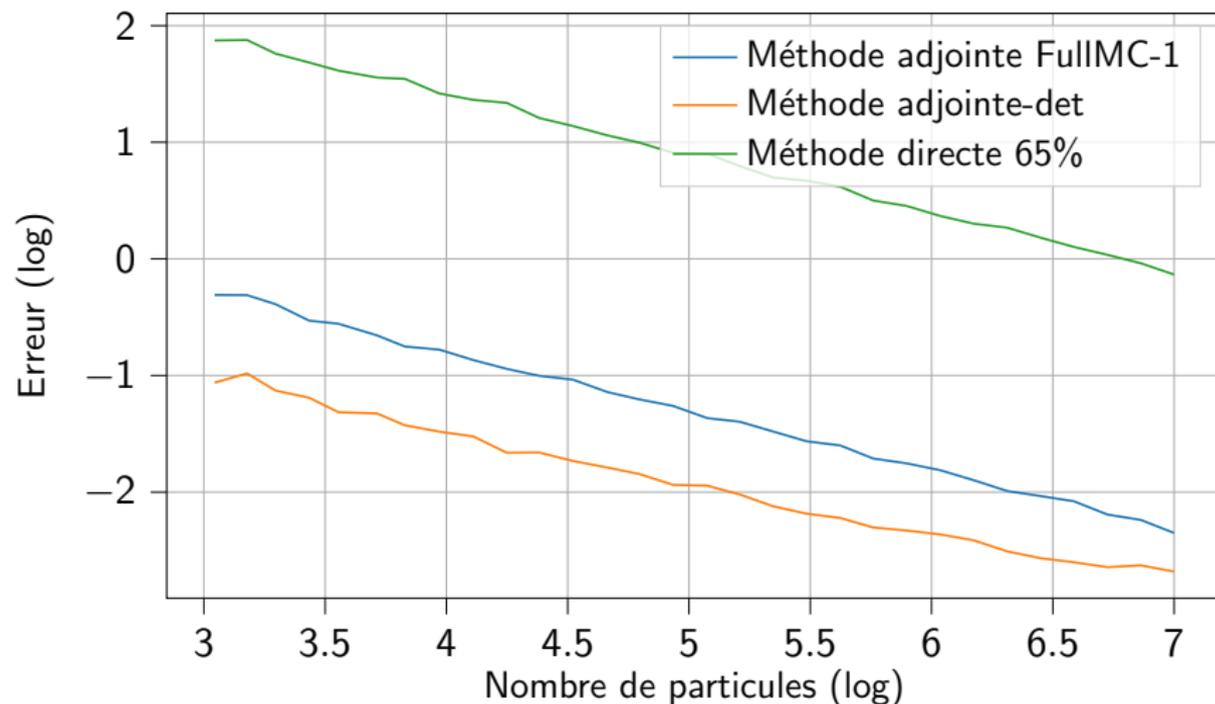
Et avec l'équation

$$\frac{\partial u}{\partial t}(t, x, \omega) + \omega \cdot \frac{\partial u}{\partial x}(t, x, \omega) + (\sigma_a + \sigma_s)u(t, x, \omega) = \sigma_s \int_{-1}^1 u(t, x, \omega') \frac{d\omega'}{2}$$

Comparaison MCA/MCD - 1D Sans source (log-log)



Comparaison MCA/MCD - 1D Avec source (log-log)

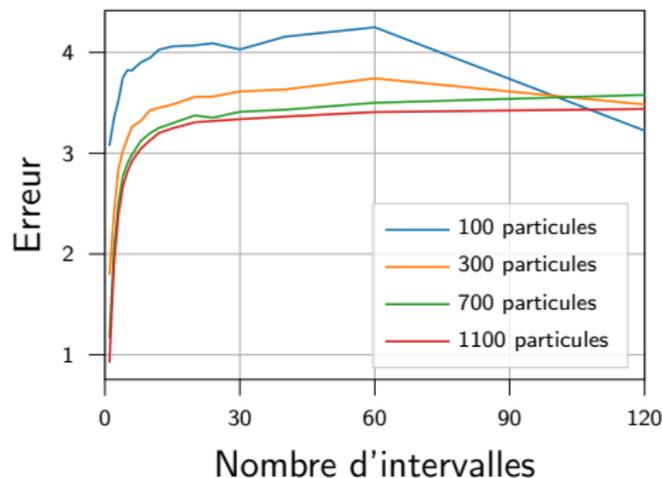


Si on considère de nombreuses itérations IMC avec ces approximations à chaque fois, l'erreur reste-elle "raisonnable" ?

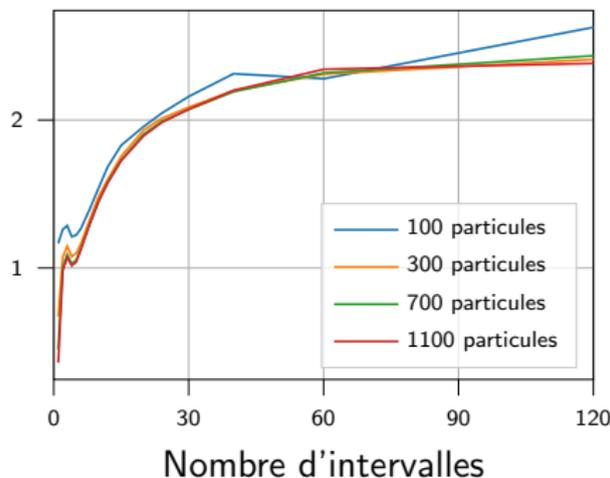
→ Pour tester, on va calculer la même trajectoire en ajoutant de plus en plus d'instantanés intermédiaires et calculer l'erreur associée

Résultats propagation de l'erreur

u_0 constante par morceaux



$u_0 : (x, \omega) \mapsto x(1 - x/5)$



→ Même avec de nombreux intervalles, l'erreur reste moindre qu'en méthode directe (respectivement 3.5 et 2.8 pour ces deux fonctions en méthode directe avec 10 000 particules)

Conditions limites :

- Absorption : envisageable en méthode adjointe, mais des particules sont "perdues"
- Réflexion : aucun souci
- Flux entrant : encore à l'étude, traitement difficile en méthode adjointe. Possibilités :
 - Arrêter les particules lorsqu'elles atteignent la limite du domaine
 - Simuler un flux entrant indirectement en ajoutant une maille artificielle contenant de la matière chaude

$$\int_0^t f(t-s, X(s), \Omega(s)) e^{-\int_0^s \sigma_a(t-\zeta, X(\zeta), \Omega(\zeta)) d\zeta} ds$$

Merci pour votre attention

Des questions ?